

データ駆動・AI駆動を中心としたデジタルトランスフォーメーションによる生命
科学研究の革新

2021 年度採択研究代表者

2021 年度 年次報告書

木賀 大介

早稲田大学 理工学術院

教授

ありえた生体高分子ネットワークを創出する BioDOS の構築

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、研究者が興味を持った生命システムの動作に対して、その動作を実現できる種々の生体分子ネットワークをコードするDNA配列を提示する、統合インターフェイスBioDOSを構築する。本計画は (Dry研究)生体分子ネットワーク候補の大量生成に続く絞り込みを行うハイブリッドAIによる配列設計、および、(Wet研究)数理モデルが保証する同型性組み合わせに基づいたシステム構築とその動作を確認する生物実験、に大別される。

ネットワーク候補の大量生成は、論理推論 AI によるルールの組み合わせで達成される。本年度は、過去に代表者が細胞内で動作させた、サブシステムの組み合わせからなる人工遺伝子回路が、ルールサブセットの特定の組み合わせにより設計されることを、計算機の処理フローと、疑似コードを書き出すことによって確認した。さらに、ルール群の別のサブセットによる別の組み合わせにより、同一の動作を行う別の人工遺伝子回路が設計できることも確認した。これは、論理推論 AI によるネットワークの大量生成が可能であることを確認できた点で意義が大きい。

ネットワークの絞り込みは、既存のネットワークとの類似度の判定、および、ネットワークの挙動の数値計算からなる。数値計算による絞り込みが可能であることは、前段落の生成時のパラメタセット群を指定することから可能であることを確認した。類似度の判定は、既存文献を教師データとした機械学習によって行う。本年度は、教師データとなる典型的な論文を収集し、その性質を整理した。

生物実験では、双安定回路に他の要素を組み合わせた回路について、環境パラメタを変化させた際の挙動を確認した。また、同一のプロモーターライブラリの、細胞内と試験管内の挙動の差異から、システム内のリソース競合があることを見出し、さらに、これを実験操作で緩和できることを明らかにした。これらの結果は、次年度以降にBioDOSが出力する遺伝子回路のサブパーツの性能検定として、大きな意義を持つ。

§ 2. 研究実施体制

(1) 木賀グループ

- ① 研究代表者:木賀 大介 (早稲田大学 理工学術院 教授)
- ② 研究項目
 - ・同型性組み合わせに基づいたシステム構築(双安定系)
 - ・同型性組み合わせに基づいたシステム構築(細胞間通信を含めた大規模遺伝子回路)
 - ・細胞内リソース競合の管理
 - ・BioDOS 構築に必要なドメイン知識の提供

(2) 山村グループ

- ① 主たる共同研究者:山村 雅幸 (東京工業大学 情報理工学院 教授)
- ② 研究項目
 - ・同型性組み合わせに基づいたシステム構築(発現振動系)
 - ・BioDOS 中での論理推論 AI による遺伝子ネットワーク候補の生成
 - ・BioDOS 中での遺伝子ネットワークの数値計算

(3) 宮崎グループ

- ① 主たる共同研究者:宮崎 和光 (大学改革支援・学位授与機構 研究開発部 教授)
- ② 研究項目
 - ・BioDOS 中での遺伝子ネットワーク候補の絞り込み
 - ・BioDOS 中での生体高分子データベースの整備

【代表的な原著論文情報】

- 1) Home Energy Management Algorithm Based on Deep Reinforcement Learning Using Multistep Prediction, *IEEE Access*, vol 9, pp. 153108–153115, 2021
- 2) Alternative state transition control by regulating the spatial arrangement of organisms using a lattice model, *Ecosphere*, DOI: 10.1002/ecs2.3981, 2022